



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2019년09월27일
(11) 등록번호 10-2026512
(24) 등록일자 2019년09월23일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01L 51/00 (2006.01) H01L 51/56 (2006.01)
(52) CPC특허분류
H01L 51/0031 (2013.01)
H01L 51/0026 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2016-0093512
(22) 출원일자 2016년07월22일
심사청구일자 2018년05월30일
(65) 공개번호 10-2018-0010810
(43) 공개일자 2018년01월31일
(56) 선행기술조사문헌
RSC Advances, S. Ameen 등, 6, 33212, 2016년
KR1020150091425 A
KR1020170078345 A

(73) 특허권자
주식회사 엘지화학
서울특별시 영등포구 여의대로 128 (여의도동)
(72) 발명자
김승하
대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원
김경훈
대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원
(74) 대리인
김애라

전체 청구항 수 : 총 6 항

심사관 : 박광묵

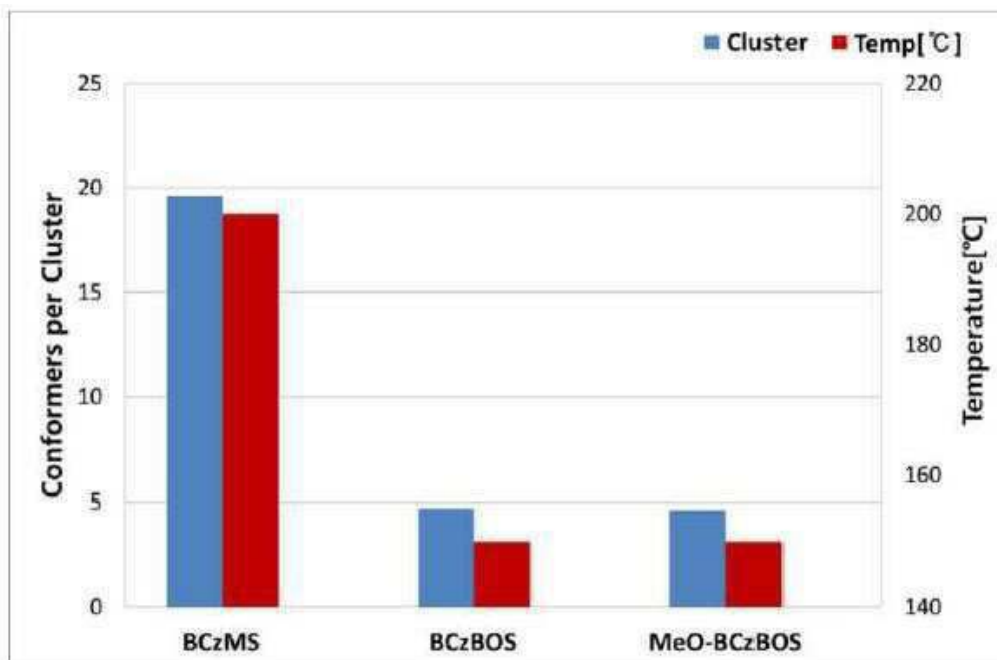
(54) 발명의 명칭 컨포머 클러스터 분석 원리를 이용한 유기 물질의 경화 온도 평가방법

(57) 요약

실험이 배제된 채 유기발광 다이오드(OLED)의 구조 정보만으로, 경화기의 위치와 OLED의 구조 변화에 따른 경화 온도의 변화를 확인할 수 있는, 컨포머 클러스터 분석 원리를 이용한 유기 물질의 경화 온도 평가방법이 개시된다. 상기 컨포머 클러스터 분석 원리를 이용한 유기 물질의 경화 온도 평가방법은, (a) 분석하고자 하는 유기발

(뒷면에 계속)

대표도 - 도3



광 다이오드의 화학 구조를 생성한 후, 양자역학을 이용하여 에너지적으로 가장 안정한 구조인 레퍼런스(reference) 구조를 생성하는 단계; (b) 상기 생성된 레퍼런스 구조에서 비틀림(torsion)이 가능한 지점마다 회전시켜, 다수의 형태 이성질체(conformer)를 생성하는 단계; (c) 분자역학(molecular mechanics)을 이용하여 상기 생성된 형태 이성질체 중 에너지적으로 가장 안정한 구조를 구하는 단계; (d) 경화기를 부착할 작용기를 지정하여 상기 레퍼런스 구조와 형태 이성질체 간의 평균 제곱근 거리(root mean square distance)를 측정한 후, 일정 이상 차이가 나는 것끼리 클러스터링(clustering)을 수행하여 그룹으로 분류하는 단계; 및 (e) 상기 클러스터링에 의해 분류된 그룹의 총 개수를 형태 이성질체의 개수로 나눈 후, 이를 파라미터로 만들어 경화 온도의 경향성을 분석하는 단계;를 포함한다.

(52) CPC특허분류

H01L 51/0072 (2013.01)

H01L 51/5056 (2013.01)

H01L 51/56 (2013.01)

명세서

청구범위

청구항 1

- (a) 분석하고자 하는 유기발광 다이오드(OLED)의 화학 구조를 생성한 후, 양자역학을 이용하여 에너지적으로 가장 안정한 구조인 레퍼런스(reference) 화학 구조를 생성하는 단계;
- (b) 상기 생성된 레퍼런스 화학 구조에서 비틀림(torsion)이 가능한 지점마다 회전시켜, 다수의 형태 이성질체(conformer)를 생성하는 단계;
- (c) 분자역학(molecular mechanics)을 이용하여 상기 생성된 다수의 형태 이성질체 중 에너지적으로 가장 안정한 구조를 구하는 단계;
- (d) 경화기를 부착할 작용기를 지정하여 상기 레퍼런스 화학 구조와 형태 이성질체 간의 평균 제곱근 거리(root mean square distance; RMSD)를 측정한 후, 일정 이상 차이가 나는 것끼리 클러스터링(clustering)을 수행하여 그룹으로 분류하는 단계; 및
- (e) 상기 클러스터링에 의해 분류된 그룹의 총 개수를 형태 이성질체의 개수로 나눈 후, 이로부터 경화 온도의 경향성을 분석하는 단계를 포함하고,

상기 유기발광 다이오드의 화학 구조가 유기발광 다이오드를 구성하는 정공수송층(Hole Transporting Layer; HTL)의 소재인 정공수송물질(Hole Transporting Materials; HTM)의 화학 구조인 것인, 컨포머 클러스터 분석 원리를 이용한 유기 물질의 경화 온도 평가방법.

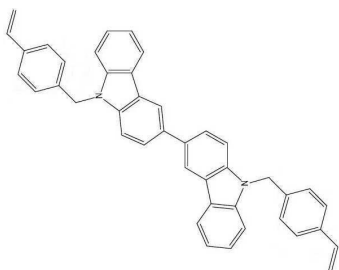
청구항 2

삭제

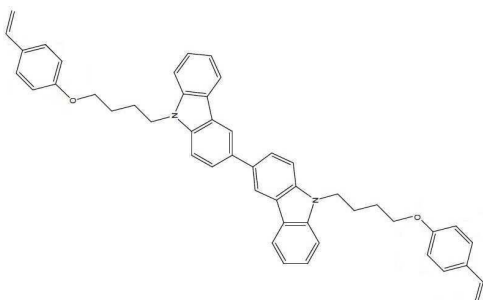
청구항 3

청구항 1에 있어서, 상기 정공수송물질(HTM)의 화학 구조는 하기 화학식 1 내지 3의 유기화합물인 것을 특징으로 하는, 컨포머 클러스터 분석 원리를 이용한 유기 물질의 경화 온도 평가방법.

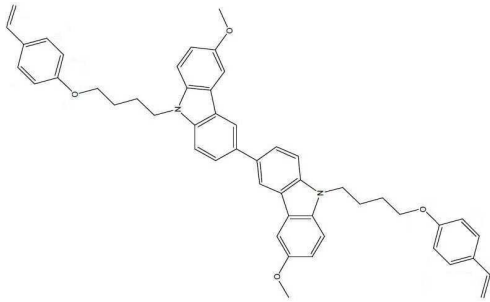
[화학식 1]



[화학식 2]



[화학식 3]



청구항 4

청구항 1에 있어서, 상기 (b) 단계의 레퍼런스 화학 구조는 비틀림이 가능한 지점마다 한 바퀴를 60 도($^{\circ}$)씩 회전시키는 것을 특징으로 하는, 컨포머 클러스터 분석 원리를 이용한 유기 물질의 경화 온도 평가방법.

청구항 5

청구항 1에 있어서, 상기 (d) 단계의 평균 제곱근 거리(RMSD)는, 경화기를 붙일 레퍼런스 화학 구조와 형태 이성질체의 각 작용기를 지정한 후, 이들 작용기 간을 측정하는 것을 특징으로 하는, 컨포머 클러스터 분석 원리를 이용한 유기 물질의 경화 온도 평가방법.

청구항 6

청구항 1에 있어서, 상기 (d) 단계의 클러스터링은, 상기 평균 제곱근 거리(RMSD) 1 Å 이상의 차이마다 수행되는 것을 특징으로 하는, 컨포머 클러스터 분석 원리를 이용한 유기 물질의 경화 온도 평가방법.

청구항 7

청구항 1에 있어서, 상기 유기 물질의 경화 온도 평가방법은, 실험이 배제된 채 정공수송물질의 화학 구조 정보만으로, 경화기의 위치와 정공수송물질의 화학 구조 변화에 따른 경화온도 변화의 확인이 가능한 것을 특징으로 하는, 컨포머 클러스터 분석 원리를 이용한 유기 물질의 경화 온도 평가방법.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 컨포머 클러스터 분석 원리를 이용한 유기 물질의 경화 온도 평가방법에 관한 것으로서, 더욱 상세하게는, 실험이 배제된 채 유기발광 다이오드(OLED)의 구조 정보만으로, 경화기의 위치와 OLED의 구조 변화에 따른 경화온도의 변화를 확인할 수 있는, 컨포머 클러스터 분석 원리를 이용한 유기 물질의 경화 온도 평가방법에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기발광 다이오드(organic light emitting diode; OLED) 제품을 만들기 위한 방법으로는, 진공 장비를 이용하여 저분자 재료 등을 증착시키는 진공증착(vacuum evaporation) 방식과, 발광 재료를 용액화(soluble)시켜 프린팅 장비로 화소를 형성하는 솔루션 프로세스(solution process) 방식이 있으며, 이 중 솔루션 프로세스 방식은 원가절감 등에 장점이 있어, 그 사용이 점차 증가되는 추세이고, 공정상 수율을 높여 보다 향상되도록 개발 중에 있다.

[0003] 이와 같은 OLED 솔루션 프로세스에 있어서 가장 중요한 사항은, 층(layer) 구조에서 각 층마다 사용되는 OLED 물질이 연속적인 코팅 공정 도중 서로 섞이지 않아야 하는 것이지만, 각 층에서 사용되는 OLED 물질은 각 용매에서의 용해도가 유사하기 때문에, 이를 방지하기가 용이하지 않다. 이를 위해, OLED 물질을 열경화를 통하여 네트워크(network) 구조로 만들어, 각 층의 OLED 물질이 솔루션 프로세스 상에서 서로 섞이지 않도록 하고 있다. 이와 같은 열경화는 주로 고온에서 이루어지며, 따라서, 열경화 시 OLED의 기판(substrate)이나 아래 층에 있는 물질에 영향을 주기 때문에, 경화 온도를 적절하게 조절하는 것이 중요하다.

[0004] 한편, 실험적 분석 방법을 통한 경화 온도 측정방법에 있어서, 종래에는 필름을 제조하여 열경화 시킨 후의 UV 측정값과, 유기용매로 씻어내려 경화가 되지 않은 모노머를 제거한 후의 UV 측정값을 비교하여, 경화된 정도를 확인할 수 있다.

선행기술문헌

비특허문헌

[0005] (비특허문헌 0001) 1. Journal of Computational Chemistry, Vol. 15, No. 12, 1331-1340(1994)
(비특허문헌 0002) 2. Computational Physics, ZIB SC 98-42, Submitted on 23 Sep 1999

발명의 내용

해결하려는 과제

[0006] 앞서 살펴본 바와 같이, 실험적 분석 방법을 통한 경화 온도 측정방법에 있어서, 종래에는 필름을 제조하여 열경화 시킨 후의 UV 측정값과, 유기용매로 씻어내려 경화가 되지 않은 모노머를 제거한 후의 UV 측정값을 비교하여, 경화된 정도를 확인할 수 있었다. 하지만, 이와 같은 방법으로는, OLED 구조와 경화기(curing)의 위치에 따른 경화 온도 변화를 효율적으로 비교하는 것이 어렵기 때문에, 이를 위한 새로운 평가 방법이 모색되어야 한다.

[0007] 따라서, 본 발명의 목적은, 실험이 배제된 채 유기발광 다이오드(OLED)의 구조 정보만으로, 경화기의 위치와 OLED의 구조 변화에 따른 경화온도의 변화를 확인할 수 있는, 컨포머 클러스터 분석 원리를 이용한 유기 물질의 경화 온도 평가방법을 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0008] 상기 목적을 달성하기 위하여, 본 발명은, (a) 분석하고자 하는 유기발광 다이오드(OLED)의 화학 구조를 생성한 후, 양자역학을 이용하여 에너지적으로 가장 안정한 구조인 레퍼런스(reference) 구조를 생성하는 단계; (b) 상기 생성된 레퍼런스 구조에서 비틀림(torsion)이 가능한 지점마다 회전시켜, 다수의 형태 이성질체(conformer)를 생성하는 단계; (c) 분자역학(molecular mechanics)을 이용하여 상기 생성된 형태 이성질체 중 에너지적으로 가장 안정한 구조를 구하는 단계; (d) 경화기를 부착할 작용기를 지정하여 상기 레퍼런스 구조와 형태 이성질체 간의 평균 제곱근 거리(root mean square distance)를 측정한 후, 일정 이상 차이가 나는 것끼리 클러스터링(clustering)을 수행하여 그룹으로 분류하는 단계; 및 (e) 상기 클러스터링에 의해 분류된 그룹의 총 개수를 형태 이성질체의 개수로 나눈 후, 이를 파라미터로 만들어 경화 온도의 경향성을 분석하는 단계;를 포함하는 컨포머 클러스터 분석 원리를 이용한 유기 물질의 경화 온도 평가방법을 제공한다.

발명의 효과

[0009] 본 발명에 따른 컨포머 클러스터 분석 원리를 이용한 유기 물질의 경화 온도 평가방법에 의하면, 실험이 배제된 채 유기발광 다이오드(OLED)의 구조 정보만으로, 경화기의 위치와 OLED의 구조 변화에 따른 경화온도의 변화를 확인할 수 있으며, 이로 인해, 경화온도를 조절할 수 있는 정량적 물성 조건의 제시가 가능하다.

도면의 간단한 설명

[0010] 도 1은 통상적인 유기발광 다이오드(OLED) 소자의 구조를 보여주는 도면이다.
도 2는 본 발명에 따른 화학식 1 내지 3의 HTM을 구조 최적화하여 생성되는 레퍼런스 구조의 3차원 모습이다.
도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 컨포머 클러스터 분석 원리를 이용한 정공수송물질(HTM)의 경화 온도를 보여주는 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

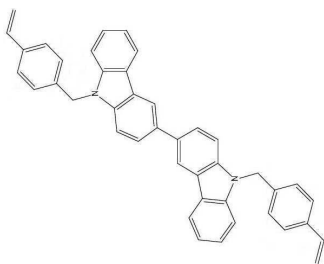
[0011] 이하, 첨부된 도면을 참조하여, 본 발명을 상세히 설명한다.

[0012] 본 발명에 따른 컨포머 클러스터 분석 원리를 이용한 유기 물질의 경화 온도 평가방법은, (a) 분석하고자 하는 유기발광 다이오드(OLED)의 화학 구조를 생성한 후, 양자역학을 이용하여 에너지적으로 가장 안정한 구조인 레퍼런스(reference) 구조를 생성하는 단계, (b) 상기 생성된 레퍼런스 구조에서 비틀림(torsion)이 가능한 지점마다 회전시켜, 다수의 형태 이성질체(conformer)를 생성하는 단계, (c) 분자역학(molecular mechanics)을 이용하여 상기 생성된 형태 이성질체 중 에너지적으로 가장 안정한 구조를 구하는 단계, (d) 경화기를 부착할 작용기를 지정하여 상기 레퍼런스 구조와 형태 이성질체 간의 평균 제곱근 거리(root mean square distance; RMSD)를 측정한 후, 일정 이상 차이가 나는 것끼리 클러스터링(clustering)을 수행하여 그룹으로 분류하는 단계 및 (e) 상기 클러스터링에 의해 분류된 그룹의 총 개수를 형태 이성질체의 개수로 나눈 후, 이를 파라미터로 만들어 경화 온도의 경향성을 분석하는 단계를 포함한다.

[0013] 본 발명에 따른 컨포머 클러스터 분석 원리를 이용한 유기 물질의 경화 온도 평가방법에 대한 각 단계의 구체적인 설명을 하기에 앞서, 먼저, OLED 소자의 구조에 대해 설명하도록 한다. 도 1은 통상적인 유기발광 다이오드(OLED) 소자의 구조를 보여주는 도면으로서, OLED 소자는, 도 1에 도시된 바와 같이, 최하층에 위치하여 OLED를 지지해주는 유리(glass) 또는 플라스틱 기재(substrate), 그 상부로 양극(Anode), 정공주입층(Hole Injecting Layer; HIL), 정공수송층(Hole Transporting Layer; HTL), 발광층(Emission Material Layer; EML), 전자주입층(Electron Injecting Layer; EIL) 및 음극(Cathode)이 순차적으로 적층된 구조로서, 상기 양극은 전류가 흐를 때 전자를 제거하여 정공(electron holes)을 생성하는 역할을 하고, 상기 정공주입층은 정공이 발광층으로 손실 없이 용이하게 들어갈 수 있도록 만들어주는 층이고, 상기 정공수송층은 정공주입층에 들어온 정공을 발광층으로 전송하기 위한 층이고, 상기 발광층은 정공과 전자가 재결합하여 빛을 방출하는 층이고, 상기 전자주입층은 음극에서 생기는 전자를 주입해주는 층이며, 상기 음극은 전자의 생성 및 전압의 공급이 이루어지는 단자이다.

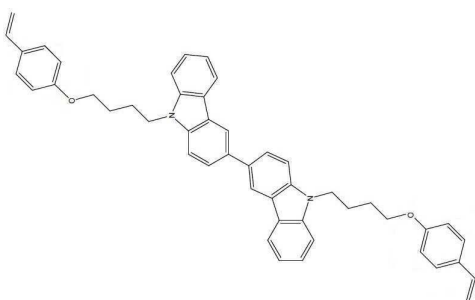
[0014] 이상과 같은 OLED의 구조를 참조하여, 우선, 분석하고자 하는 유기발광 다이오드(OLED)의 화학 구조를 생성한 후, 양자역학을 이용하여 에너지적으로 가장 안정한 구조인 레퍼런스(reference) 구조를 생성하는 (a) 단계에 대하여 설명한다. 상기 (a) 단계는 유기발광 다이오드(OLED)의 화학 구조, 정확하게는, OLED를 구성하는 층 가운데 정공수송층(Hole Transporting Layer; HTL)의 소재인 정공수송물질(Hole Transporting Materials; HTM)의 화학 구조를 양자역학으로 최적화하여 레퍼런스 구조를 생성하는 단계로서, 예를 들어, 가우시안(Gaussian)과 같은 양자계산 프로그램을 이용할 수 있으며, 상기 정공수송물질(HTM)로는, 하기 화학식 1 내지 3과 같은 유기 화합물을 예로 들 수 있다(하기 화학식 1 내지 3은, [RSC Adv., 6, 33212-33220, 2016, S.Ameen et al.] 논문을 참조한 것으로서, 화학식 1은 비닐벤질이 포함된 바이카바졸(BCzMS), 화학식 2는 부톡시스타이렌이 포함된 바이카바졸(BCzBOS), 화학식 3은 부톡시스타이렌이 포함된 메톡시-바이카바졸(MeO-BCzBOS)이다).

[0015] [화학식 1]



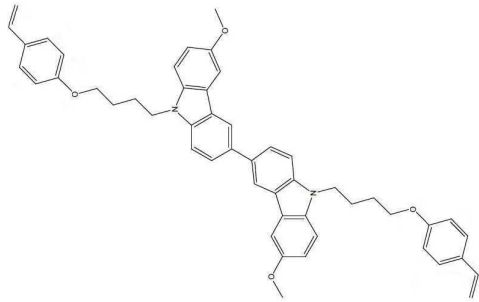
[0016]

[0017] [화학식 2]



[0018]

[0019] [화학식 3]



[0020]

[0021] 도 2는 본 발명에 따른 화학식 1 내지 3의 HTM을 구조 최적화하여 생성되는 레퍼런스 구조의 3차원 모습으로서 (도 2의 A 내지 C는 차례대로 화학식 1 내지 3의 레퍼런스 구조), 이와 같이, 상기 정공수송물질(HTM)의 구조를 최적화하여 에너지적으로 가장 안정한 도 2에 도시된 바와 같은 레퍼런스 구조가 생성되면, 상기 레퍼런스 구조에서 비틀림(torsion)이 가능한 지점마다 한 바퀴를 60 도($^{\circ}$)씩 회전시켜, 즉, 다시 말해, 비틀림 각도(torsion angle)를 다르게 해가며 형태 이성질체(conformer)를 생성하여야 하며(step b), 비틀림 각도에 따라 나올 수 있는 모든 이성질체의 개수가 구조에 따라 1,000개 이상 나올 수 있기 때문에, 이와 같은 형태 이성질체의 개수 계산 방법으로 볼츠만 점프법(Boltzmann jump 또는 Boltzmann sampling)을 사용할 수 있다. 즉, 상기 볼츠만 점프법에 의하면, 변경된 비틀림 각도가 수용될 지 아닐 지를 메트로폴리스(Metropolis) 방법을 이용 및 선택함으로써, 1,000개의 이성질체를 형성하게 된다.

[0022] 계속해서, 다수의 형태 이성질체가 생성되면, 분자역학(molecular mechanics)을 이용하여 상기 생성된 형태 이성질체 중 에너지적으로 가장 안정한 구조를 구한 후(즉, 구조 최적화를 수행한 후) (step c), 경화기를 부착할 작용기를 지정하여 상기 레퍼런스 구조와 형태 이성질체 간의 평균 제곱근 거리(root mean square distance; RMSD)를 측정 후, 일정 이상 차이가 나는 것끼리 클러스터링(clustering)을 수행하여 그룹으로 분류한다(step d). 상기 d 단계를 보다 구체적으로 설명하면, 경화기를 붙일 레퍼런스 구조와 형태 이성질체의 각 작용기를 지정한 후, 이들 작용기 간 평균 제곱근 거리(RMSD)를 측정하는 것이며, 이어서, 평균 제곱근 거리(RMSD) 일정 이상, 예를 들어, 약 1 Å 이상의 차이마다 클러스터링(clustering)을 수행하여 그룹으로 분류하게 된다.

[0023] 마지막으로, 상기 클러스터링에 의해 분류된 그룹의 총 개수를 형태 이성질체의 개수로 나눈 후, 이를 파라미터로 만들어 경화 온도의 경향성을 분석한다(step e). 즉, 상기 (e) 단계는 클러스터링에 의해 분류된 그룹의 총 개수, 다시 말해, 총 클러스터(cluster)의 개수를 이용하여 파라미터를 계산함으로써, OLED 유기 물질의 경화 온도 경향성을 분석 확인하는 것이 가능하다.

[0024] 이상 상술한 바와 같은, 본 발명에 따른 컨포머 클러스터 분석 원리를 이용한 유기 물질의 경화 온도 평가방법은, 유기발광 다이오드(OLED) 물질의 형태 이성질체(conformer)에 대해 클러스터링 계산의 원리를 이용한 것으로서, 실험이 배제된 채 유기발광 다이오드의 구조 정보만으로, 경화기의 위치와 OLED의 구조 변화에 따른 경화 온도의 변화를 확인할 수 있는 장점이 있으며, 이로 인해, 향후 경화온도를 조절할 수 있는 정량적 물성 조건을 제시하는데 커다란 역할을 할 것으로 예상된다.

[0025] 이하 본 발명의 이해를 돕기 위하여 바람직한 실시예를 제시하나, 하기 실시예는 본 발명을 예시하는 것일 뿐, 본 발명의 범주 및 기술사상 범위 내에서 다양한 변경 및 수정이 가능함은 당업자에게 있어서 명백한 것이며, 이러한 변경 및 수정이 첨부된 특허청구범위에 속하는 것도 당연한 것이다.

[0026] [실시예 1] OLED 유기물의 컨포머 클러스터 분석

[0027] 유기발광 다이오드(OLED)의 제조방법 중 하나인 솔루션 프로세스(solution process)를 이용하여, 정공수송물질(Hole Transporting Materials; HTM)로 정공수송층(Hole Transporting Layer; HTL)을 형성함에 있어서, 정공수송물질(HTM)의 구조에 따른 경화 온도의 변화를, 컨포머 클러스터 분석법을 통해 정량적으로 분석하였다. 보다 구체적으로, 상기 화학식 1 내지 3의 정공수송물질(HTM)에서, 카바졸(carbazole)기의 질소 원자와, 이로부터 알킬 사슬(alkyl chain)로 연결되어 있는 벤젠 고리 사이의 알킬 사슬의 길이 변화를 주었을 때, 구조마다 경화 온도가 얼마나 변화하는지, 각 구조의 형태 이성질체(conformer)에 대한 클러스터링을 통하여 비교 분석하였으며, 차례대로, 가우시안(Gaussian) 양자계산 프로그램으로 DFT의 B3PW91 hybrid functional를 이용하여, 정공수송물질(Hole Transporting Materials; HTM)의 화학 구조를 양자역학으로 최적화하여(에너지적으로 가장 안정한 구조를 구해서) 레퍼런스 구조를 생성하였고, 레퍼런스 구조의 비틀림 각도(torsion angle)를 다르게

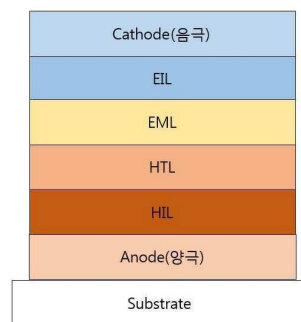
하면서, Materials Studio의 모듈인 형태 이성질체의 볼츠만 샘플링법을 이용하여 1,000 개의 형태 이성질체를 생성하였고, 경화기를 붙일 레퍼런스 구조와 형태 이성질체의 각 작용기를 지정한 후, 이들 작용기 간 평균 제곱근 거리(RMSD)를 측정하여 약 1 Å 이상의 차이마다 클러스터링을 수행하여 그룹으로 분류하였으며, 상기 클러스터링에 의해 분류된 그룹의 총 개수를 형태 이성질체의 개수로 나눈 후, 이를 파라미터로 만들어 OLED 유기 물질의 경화 온도 경향성을 분석하였다.

[0028] [실시예 1] 컨포머 클러스터 분석에 의한 OLED 유기물의 경화 온도 평가

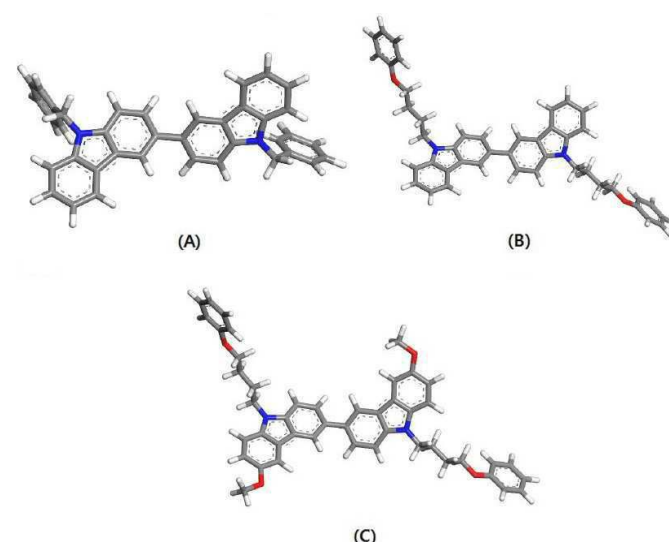
[0029] 도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 컨포머 클러스터 분석 원리를 이용한 정공수송물질(HTM)의 경화 온도를 보여주는 그래프로서, 실험을 배제한 채 OLED 유기 물질의 경화 온도 경향성을 분석한 결과, 도 3에 도시된 바와 같이, MeO-BCzBOS, BCzBOS 및 BCzMS 순으로 경화온도가 높았으며, 보다 명확한 결과를 확인하기 위하여 실험을 실시한 결과, 실험에 의해서도 본 발명과 동일하게 MeO-BCzBOS, BCzBOS 및 BCzMS 순으로 경화온도가 높은 것을 확인할 수 있었다. 따라서, 본 발명에 따른 컨포머 클러스터 분석 원리를 이용한 유기 물질의 경화 온도 평가방법을 이용하게 되면, 실험 없이도 OLED의 구조 정보만으로 경화 온도의 변화를 간단하고 편리하게 확인할 수 있음을 알 수 있다.

도면

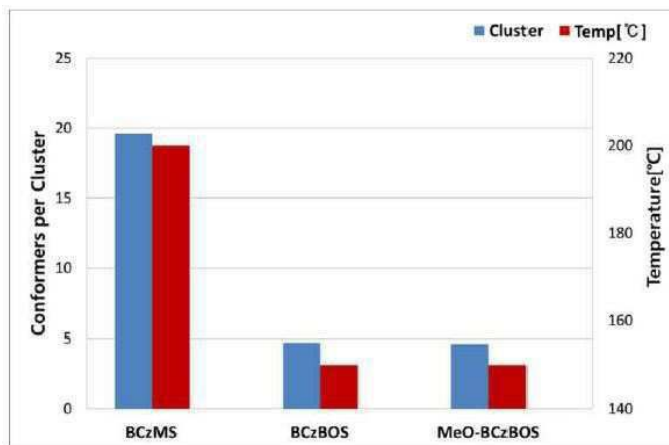
도면1



도면2



도면3



专利名称(译)	符合聚类分析原理的有机材料固化温度评估方法		
公开(公告)号	KR102026512B1	公开(公告)日	2019-09-27
申请号	KR1020160093512	申请日	2016-07-22
[标]申请(专利权)人(译)	乐金化学股份有限公司		
申请(专利权)人(译)	LG化学有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	LG化学有限公司		
[标]发明人	김승하 김경훈		
发明人	김승하 김경훈		
IPC分类号	H01L51/00 H01L51/56		
CPC分类号	H01L51/0031 H01L51/0026 H01L51/0072 H01L51/5056 H01L51/56		
代理人(译)	金.		
审查员(译)	Bakgwangmuk		
其他公开文献	KR1020180010810A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

利用构象聚类分析原理对有机材料的固化温度进行评估，可以在不排除实验的情况下，仅根据有机发光二极管（OLED）的结构信息，即可根据固化装置的位置和OLED的结构变化来确定固化温度的变化。已启动。使用构象聚类分析原理评估有机材料的固化温度的方法包括：（a）生成要分析的有机发光二极管的化学结构，然后使用量子力学来指代最能稳定能量的结构。创建一个结构；（b）在所产生的参考结构中旋转多个扭转点以产生多个适形体；（c）利用分子力学获得所得到的共形异构体在能量上最稳定的结构；（d）通过指定连接固化基团的官能团，然后在聚类的基础上进行聚类，测量参考结构与异构体之间的均方根距离步骤；并且（e）将通过聚类分类的基团总数除以构象异构体的数目，并提供参数以分析固化温度的趋势。

[화학식 2]

